

Сравнение значений магнитных моментов атомов в разных слоях позволяет сделать вывод, что наибольшим моментом обладают атомы наиболее удаленные от подложки. Магнитный момент атома кобальта в сплаве больше магнитного момента атома в пленке чистого кобальта. Также полная энергии системы $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}$ при $x = 0,5$ больше, чем при $x=0$. Полученные значения могут быть использованы для определения параметров обменного взаимодействия и коэффициента магнитосопротивления для мультислойных структур с эффектами гигантского магнитосопротивления [3].

Список публикаций:

[1] G.Marsman, M.Kresse. VASP the GUIDE. Wien: Universitat Wien. 2000. P.208.

[2] G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method// Phys. Rev. B 59.1999. p. 1758.

[3] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Д.Е. Романовский, Моделирование методами Монте-Карло мультислойных магнитных структур и расчет коэффициента магнитосопротивления // Письма в ЖЭТФ, Т.102, 10, с. 759-765

Теоретическое исследование HR-XANES спектров M4-края урана

Подковырина Юлия Сергеевна

Пидченко Иван Николаевич, Витова Тоня, Солдатов Александр Владимирович

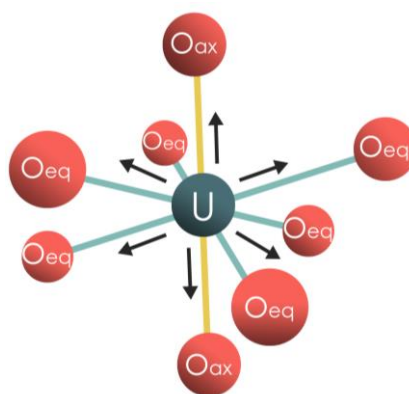
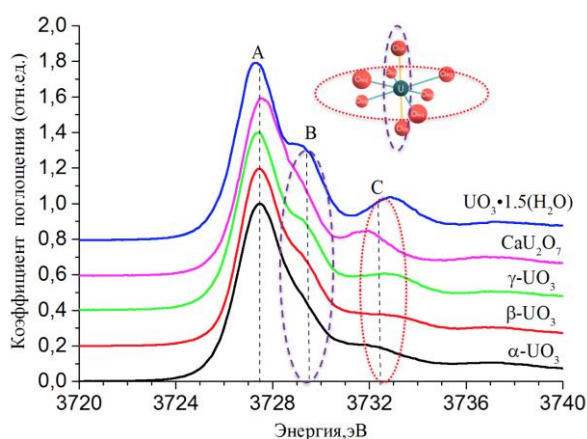
Южный федеральный университет

МИЦ «Интеллектуальные материалы»

yuliya.podkovyrina@bk.ru

В настоящей работе были проведены теоретические расчеты HR-XANES спектров M4-края U в α -, β -, γ -фазах триоксида урана UO_3 . Ранее в работах было показано [1], что спектроскопии рентгеновского поглощения с высоким энергетическим разрешением (HR-XANES) M4-края U ($3d_{3/2} \rightarrow 5f$) может успешно применяться для изучения электронной и атомной структуры ураносодержащих материалов за счет снижения экспериментального уширения. Объекты исследования были выбраны с целью отработки методики установления уранильного или уранатного типа связи U-O. Настоящей задачей данного исследования было выявить и установить изменения длины связи между атомом U и двумя аксиальными атомами O при уранильном типе связи. В таком случае U(IV) образует две короткие ($<1.8 \text{ \AA}$) ковалентные аксиальные связи с двумя атомами кислорода (U-O_{ax}). Экспериментальные измерения (рис. 1а) M4-края U для исследуемых образцов α -, β -, γ - UO_3 , а также для референтных соединений $\text{UO}_3 \cdot 1.5(\text{H}_2\text{O})$ (меташопит) и $\text{Ca}_2\text{U}_2\text{O}_7$ (кальций уранат) были осуществлены на источнике синхротронного излучения ANKA (г.Карлсруэ, Германия) [2,3] с помощью 5-ти кристалльного эмиссионного спектрометра станции INE.

Было проведено *ab-initio* теоретическое моделирование спектров M4-края поглощения для всех вышеуказанных соединений в рамках теории полного многократного рассеяния. Также были рассчитаны спектры для моделей описывающие следующие случаи: а) сжатие/растяжение U-O_{ax} , б) сжатие/растяжение U-O_{eq} в) сжатие/растяжение и U-O_{ax} и U-O_{eq} (рис 1.б).



а)

б)

рис. 1 а) Экспериментальные HR-XANES спектры M4-края U, б) теоретические модели для изучения влияния варьирования длин U-O_{ax} и U-O_{eq}

Все спектры HR-XANES имеют по три особенности в области A ($\sim 3727 \text{ эВ}$), B ($\sim 3729 \text{ эВ}$) and C ($\sim 3732 \text{ эВ}$), как изображено на рисунке 1а, которые соответствуют электронным переходам с $3d_{3/2}$ на $5f_5/5f_6$, $5f_7$ и $5f_8$ незаполненные валентные орбитали U(VI) в уранил-ионе UO_2^{2+} [6]. Гибридизированные $5f$ и $6p$ орбитали U

образуют сигма ковалентные связи в основном с 2р орбиталями кислорода, в силу чего энергетическая позиция особенности С существенно зависит от длины связи U-O [8]. Известно, что чем короче расстояния между атомами U и O, тем более ковалентная связь образуется между этими атомами. Интенсивность особенности С должна увеличиваться с ростом степени ковалентности связи U-O_{ак}. Расчеты, произведенные с помощью компьютерного кода FEFF9.6, реализующего метод многократного рассеяния, позволили подтвердить данное предположение. Таким образом спектры рентгеновского поглощения HR-XANES M4-края U можно использовать для оценки степени ковалентности связи U-O_{ак}.

Список публикаций:

1. Denecke 2006 *Coordin Chem Rev*, 250, 730-754.
2. Rothe J, Butorin S, Dardenne K, Denecke M A, Kienzler B, Loble M, Metz V, Seibert A, Steppert M, Vitova T, Walther C, Geckeis H 2012 *Rev Sci Instrum*, 83.
3. T. Vitova, Denecke M A, Göttlicher J, Jorissen K, Kas J, Kvashnina K, Prüßmann T, Rehr J, Rothe J 2013 *Journal of Physics: Conference Series*, 430, 012117.

Прогнозирование параметров детонации и факторов чувствительности высокоэнергетических материалов

Празян Тигран Леонидович

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

Prazyan.tigran@yandex.ru

Расчет и дальнейший анализ физико-химических свойств энергетических материалов является одним из наиболее эффективных средств исследования, используемый перед синтезом данных веществ. Таким образом, настоящая работа посвящена расчету структурных, электронных и детонационных характеристик перспективных взрывчатых веществ, ранее не синтезированных [1,2].

Объектами исследования в настоящей работе являются малоизученные и в настоящее время не синтезированные взрывчатые вещества C₃N₅H₃O₄ (A1) и C₆N₅H₃O₆ (TNDP). Посредством первопринципных расчетов для них проведена оптимизация параметров кристаллической решетки с использованием пакета Quantum ESPRESSO [3]. Полная энергия вычислена методом псевдопотенциала в рамках теории функционала плотности в параметризации PBE для обменно-корреляционной энергии. Для учета межмолекулярного взаимодействия использовалась схема Гримма [4], а также использовались ультрамягкие псевдопотенциалы для всех атомов. Оптимизированные параметры кристаллов в дальнейшем послужили для расчета электронных и детонационных свойств в рамках гибридного функционала B3LYP пакета CRYSTAL14 [5]. Базис [6], используемый в пакете CRYSTAL14: C_6-21G*, H_3-1p1G, N_6-31d1G, O_6-31d1

Дискрипторы, полученные в настоящей работе: M_{ave} – средняя молекулярная масса (г/моль), Q – химическая энергия детонации (кДж/моль), ρ – плотность (г/см³), N – число газообразных продуктов детонации на грамм взрывчатого вещества (моль/г), кислородный баланс OB_{100%} (%), усредненный заряд всех нитрогрупп Q_{NO2} (e⁻), т.к. в каждом из объектов имеется по несколько групп NO₂, полная энергия E_{total} (кДж/моль), дисперсионная поправка для кристаллов E_{disp} (кДж/моль) и ширина запрещенной зоны E_g (эВ).

По ранее предложенным [5] формулам для расчета скорости детонации D (км/с), детонационного давления P (ГПа) и чувствительности к удару H_{50%} (см) эти величины для энергетических материалов A1 и TNDP составили 7,29 км/с, 29,6 ГПа, 112 см и 7,71 км/с, 28,2 ГПа, 191 см, соответственно.

Также выявлены зависимости чувствительности к удару от таких определяющих факторов как энергетический зазор, усредненный заряд нитрогруппы и химическая энергия детонации.

Список публикаций:

- [1] Празян Т. Л., Исследование физико-химических свойств ряда взрывчатых веществ методами компьютерного моделирования / Т. Л. Празян, Ю. Н. Журавлев // Вестник КемГУ. 2014. № 4 (60). Т. 2. С. 137-144.
- [2] Празян Т. Л., Исследование физико-химических свойств FOX-7 / Т. Л. Празян, Ю. Н. Журавлев // Известия ВУЗов. Физика. 2015. № 7/2. Т. 58. С. 102-107.
- [3] Giannozzi, P. Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // J. Phys.: Condens. Matter, 2009, Vol.21. P.395502.
- [4] Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // J. Comput. Chem., 2006. Vol.27. P.1787-1799.
- [5] Dovesi, R. CRYSTAL14 User's Manual / R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti [et al.] // Torino: University of Torino, 2014.
- [6] CRYSTAL Basis Sets Library [Электронный ресурс] URL: http://www.crystal.unito.it/Basis_Sets/Ptable.html (дата обращения 27.02.2017).
- [7] Празян Т. Л., Исследование методами теории функционала плотности электронной структуры высокоэнергетических материалов / Т. Л. Празян // Сборник материалов XV Российской научной студенческой конференции "Физика твердого тела". 2016. С.203-205.